Index

Pagina

Commentationes et Relationes

De Alti, G., see Galasso, V. 411

Baird, N. C., J. M. Sichel, and M. A. Whitehead: A Molecular Orbital Approach to Electronegativity Equalization 38
Berthier, G., voir Praud, L., et P. Millie 169
Billingsley, II, F. P., and J. E. Bloor: Theoretical Studies on the Electronic Spectra of Substituted Aromatic Molecules. IV. PPP-SCF Parameters for Polysubstituted Benzenes and Five-Membered Ring Heterocyclics Containing Nitrogen, Oxygen and Sulfur 325
Blight, D. G., and D. L. Kepert: Solutions of Octacyanometallate Anions. A Possible Case of Fluctional Structure 51
Bloor, J. E., see Billingsley, II, F. P. 325
Bonnet, M.: Structure électronique de quelques dérivés nitrés insaturés (méthode L.C.A.O. améliorée) 361
Brown, R. D., M. F. O'Dwyer, and K. R. Roby: Effect of Ionic Lattices on Electronic Structures of Polyatomic Ions. II. Sulphate 1
Budziński, J., and J. S. Kwiatkowski: Electronic Spectra of Diaminopyridines . . 358

Chojnacki, H.: Repulsion Integral Parametrization of the SCF LCAO MO CI Method for Nitrogen Heteroaromates 174
Chong, D. P.: Constrained Variations for Diatomic Forces and Force Constants 205

Dahl, J. P., and H. Johansen: Electronic Structure of the Permanganate Ion 8
— — Electronic Structures of Tetrahedral CrO_4^{2-}, VO_4^{3-} and $TiCl_4$ 26
Denis, A., and M. Gilbert: Some Effects of Protonation on the Electronic Structure of Pyridine and Cytosine 31
O'Dwyer, M. F., see Brown, R. D., and K. R. Roby 1

Evleth, E. M.: The Electronic Structures of Pyridine-N-Oxide and Related Compounds 145

Faucher, J.-P., voir Labarre, J.-F., M. Graffeuil, M. Pasdeloup et J.-P. Laurent 423
Feuer, J., see Herndon, W. C., and L. H. Hall 178
Fisk, C., see Thorhallsson, J., and S. Fraga 455
Fraga, S., see Thorhallsson, J., and C. Fisk 455
François, P., et A. Julg: Recherches sur la géometrie de quelques hydrocarbures non-alternants: cas des molécules possédant plusieurs structures possibles (pentalène, heptalène, azulène) 128

Galasso, V.: Electronic Structure and Spectra of Fused n/m Ring Systems with One or Two Bridgehead Nitrogen Atoms. III. Quinolizinium Cation and Aza-Analogs . . . 417
—, and G. De Alti: Electronic Structure and Spectra of Fused n/m Ring Systems with One or Two Bridgehead Nitrogen Atoms. II. Azapentalenes 411
Giessner-Prettre, C., and A. Pullman: On the Calculation of Molecular Dipole Moments 159
Gilbert, M., see Denis, A. 31
Gliemann, G.: Ein Beitrag zur Koordinatenstreckung und Störungsrechnung bei Mehrzentrensystemen 75
Gombás, P.: Über eine Korrektion des statistischen Besetzungsverbotpotentials 210
Graffeuil, M., voir Labarre, J.-F., J.-P. Faucher, M. Pasdeloup et J.-P. Laurent 423
Gründler, W., s. Issleib, K. 107

Pagina

HALL, L. H., see HERNDON, W. C., and J. FEUER 178
HERNDON, W. C., J. FEUER, and L. H. HALL: A Molecular Orbital Study of the Difluorodiazine (N_2F_2) System 178
HINCHLIFFE, A., and N. TRINAJSTIC: The Electronic Properties of Conjugated Ions. II . . 271
TEN HOOR, M. J.: Note on the Hylleraas-Eckart Split-Shell Description of the Groundstate of Atomic Two-Electron Systems 85
HRABĚ, P., see PALDUS, J. 401

ISSLEIB, K., u. W. GRÜNDLER: Berechnung ketten- und ringförmiger Phosphorwasserstoffe nach einem erweiterten MO-LCAO-Verfahren 107

JOHANSEN, H., see DAHL, J. P. 8
— see DAHL, J. P. 26
JORDAN, F.: Theoretical Calculation of the Structure and Electronic Properties of Dihydrothymines and Dihydrouracils 390
JULG, A., voir FRANCOIS, P. 128
JUNGEN, M.: Vergleich einiger vereinfachter Methoden zur Lösung des SCF-Problems bei Systemen mit ungepaarten Elektronen 193

KEPERT, D. L., see BLIGHT, D. G. 51
KUNII, T. L., and H. KURODA: Ionization Potentials and Electron Affinities of Carbo- and Heterocyclic π-Conjugated Molecules 97
KURODA, H., see KUNII, T. L. 97
KWIATKOWSKI, J. S.: Electronic Spectra of the 2-Oxypurine Isomers 167
— see BUDZIŃSKI, J. 358

LABARRE, J.-F., M. GRAFFEUIL, J.-P. FAUCHER, M. PASDELOUP et J.-P. LAURENT: Une méthode simple de calcul des structures électroniques ($\sigma + \pi$) des borazines et des boroxines substitués de symétrie D_{3h}: une estimation théorique de l'aromaticité comparée de ces molécules 423
LAURENT, J.-P., voir LABARRE, J.-F., M. GRAFFEUIL, J.-P. FAUCHER et M. PASDELOUP 423

MANTIONE, M.-J.: Rôle de la polarisation dans les moments dipolaires des complexes dits «de transfert de charge» 119
MILLIE, P., voir PRAUD, L., et G. BERTHIER 169
MOIREAU, M.-CL., and A. VEILLARD: Quantum Mechanical Calculations on Barriers to Internal Rotation. II. The Borazane Molecule BH_3-NH_3 344
MORITA, H., and S. NAGAKURA: The Electronic Absorption Spectra and the Electronic Structures of Cytosine, Isocytosine, and Their Anions and Cations 279
MURRELL, J. N., and G. SHAW: H—H Interactions in the Region of Small Orbital Overlap 434

NAGAKURA, S., see MORITA, H. 279
NARASIMHAN, P. T., see RAY, N. K. 156
NOMURA, O., see TAKETA, H., H. TATEWAKI, and K. OHNO 369

OHNO, K., see TAKETA, H., H. TATEWAKI, and O. NOMURA 369

LA PAGLIA, S. R.: FEMO Treatment of all Trans-Polyenes with Parametric Energy Dependences 89
PALDUS, J., and P. HRABĚ: Extended Hückel Method: Calculation of the Ethylene Force Field 401
PASDELOUP, M., voir LABARRE, J.-F., M. GRAFFEUIL, J.-P. FAUCHER et J.-P. LAURENT 423
PRAUD, L., P. MILLIE et G. BERTHIER: Structure électronique comparée des isomères conjugués du benzène 169
PUJOL, L., et J.-C. SIMON: Méthode directe de calcul des effets d'écran dans les atomes. Cas des atomes ou ions dans leur état fondamental possédant 3 à 10 électrons . . . 59
PULLMAN, A., see GIESSNER-PRETTRE, C. 159

Pagina

RAY, N. K., and P. T. NARASIMHAN: Unrestricted Hartree-Fock Calculations of Spin Density Distributions in the Radical Anions of Some Heterocycles Derived from Thiophene, Furan and Pyrrole . . . 156
REINSCH, E.-A.: Theoretische Überlegungen zur Cyclooctatetraensynthese nach Reppe. 296
ROBERTS, P. J.: Atomic Three-Electron Integrals for Correlated Slater-Type s Orbitals . 274
ROBY, K. R., see BROWN, R. D., and M. F. O'DWYER . . . 1
RUCH, E.: Homochiralität als Klassifizierungsprinzip von Molekülen spezieller Molekülklassen . . . 183

SALEZ, C., and A. VEILLARD: A Comparison of Different Contractions for Molecular Calculations with Gaussian-Type Functions . . . 441
SATURNO, A. F.: Simple Electrostatic Model for the I—A Approximation . . . 365
SCHWARZ, W. H. E.: Das Kombinierte Näherungsverfahren. I. Theoretische Grundlagen. 307
— Das Kombinierte Näherungsverfahren. III. Rechnungen an atomaren Zweivalenzelektronensystemen . . . 377
SICHEL, J. M., see BAIRD, N. C., and M. A. WHITEHEAD . . . 38
— and M. A. WHITEHEAD: Semi-Empirical All Valence Electrons SCF-MO-CNDO Theory. II. Interatomic Parameters and Bonding Energies . . . 220
— — Semi-Empirical All Valence Electrons SCF-MO-CNDO Theory. III. Orbital Energies and Ionization Potentials . . . 239
— — Semi-Empirical All Valence Electrons SCF-MO-CNDO Theory. IV. Dipole Moments . . . 254
— — Semi-Empirical All Valence Electrons SCF-MO-CNDO Theory. V. Quadrupole Coupling Constants . . . 263
SHAW, G., see MURRELL, J. N. . . . 434
SIMON, J.-C., voir PUJOL, L. . . . 59
SLEEMAN, D. H.: The Determination of SCF LCAO Solutions for Open Shell Configurations . . . 135
SMITH, P. W., R. STOESSIGER, and A. G. WEDD: Comment on the Extended Hückel Method Applied to Transition Metal Complexes . . . 81
STAMPER, J. G.: A Note on the Treatment of Quadruple Excitations in Configuration Interaction . . . 459
STOESSIGER, R., see SMITH, P. W., and A. G. WEDD . . . 81

TAKETA, H., H. TATEWAKI, O. NOMURA, and K. OHNO: Preliminary Calculations on Excited States of the Oxygen Molecule . . . 369
TATEWAKI, H., see TAKETA, H., O. NOMURA, and K. OHNO . . . 369
THOMSON, C.: Zero-Field Splittings in Aromatic Triplet States. III. Naphthalene, Including Accurate Two, Three and Four Centre Integrals . . . 165
THORHALLSSON, J., C. FISK, and S. FRAGA: Physical Properties of Many-Electron Atomic Systems Evaluated from Analytical Hartree-Fock Functions. VIII. The Use of Approximate Functions for Lowest and Excited States . . . 455
TINLAND, B.: An SCF-CI Study of Steric Effects in Hydrocarbon Molecules Containing Phenyl or Naphtyl Groups, in Relation with their Electronic Spectra . . . 385
— A CNDO Study of Steric Effects in Biphenyl . . . 452
TRINAJSTIC, N., see HINCHLIFFE, A. . . . 271

VEILLARD, A., see MOIREAU, M.-CL. . . . 344
— see SALEZ, C. . . . 441

WEDD, A. G., see SMITH, P. W., and R. STOESSIGER . . . 81
WHITEHEAD, M. A., see SICHEL, J. M. . . . 220
— see SICHEL, J. M. . . . 239
— see SICHEL, J. M. . . . 254
— see SICHEL, J. M. . . . 263
— see BAIRD, N. C., and J. M. SICHEL . . . 38

Pagina

Recensiones

CHU, B.: Molecular Forces (based on the Baker lectures of P. J. W. DEBYE) (Ref. J. A. A. KETELAAR) 182
Structure and Bonding, Vol. 3. Ed. C. K. JØRGENSEN, J. B. NEILANDS, R. S. NYHOLM, D. REINEN, and R. J. P. WILLIAMS (Ref. R. HOPPE) 278
JØRGENSEN, C. K., J. B. NEILANDS, R. S. NYHOLM, D. REINEN, and R. J. P. WILLIAMS: Structure and Bonding, Volume 3 (Ref. R. HOPPE) 278

Erratum

RUCH, E.: Homochiralität als Klassifizierungsprinzip von Molekülen spezieller Molekülklassen [Theoret. chim. Acta (Berl.) **11**, 183 (1968)]. 462

Theoretica Chimica Acta

For speedy publication, this journal is issued at frequent intervals, according to the amount of material received, 5 issues normally constituting one volume. Price per volume: DM 96.—.

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries, including all rights of photocopying or reproduction by any other method.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 5 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 96.—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît aux courts intervalles, dans la mesure des articles reçus. En générale un volume se compose de 5 fascicules. Le prix de chaque volume est de 96 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscript accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que les ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . ., des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis par la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

Pagina

Commentationes

TAKETA, H., H. TATEWAKI, O. NOMURA, and K. OHNO: Preliminary Calculations on Excited States of the Oxygen Molecule 369

SCHWARZ, W. H. E.: Das Kombinierte Näherungsverfahren. III. Rechnungen an atomaren Zweivalenzelektronensystemen 377

Hellmann's Pseudopotential Method. III. Calculations on Atomic Systems with Two Valence Electrons

TINLAND, B.: An SCF-CI Study of Steric Effects in Hydrocarbon Molecules Containing Phenyl or Naphtyl Groups, in Relation with their Electronic Spectra 385

JORDAN, F.: Theoretical Calculation of the Structure and Electronic Properties of Dihydrothymines and Dihydrouracils 390

PALDUS, J., and P. HRABĚ: Extended Hückel Method: Calculation of the Ethylene Force Field 401

GALASSO, V., and G. DE ALTI: Electronic Structure and Spectra of Fused n/m Ring Systems with One or Two Bridgehead Nitrogen Atoms. II. Azapentalenes 411

— Electronic Structure and Spectra of Fused n/m Ring Systems with One or Two Bridgehead Nitrogen Atoms. III. Quinolizinium Cation and Aza-Analogs 417

LABARRE, J.-F., M. GRAFFEUIL, J.-P. FAUCHER, M. PASDELOUP et J.-P. LAURENT: Une méthode simple de calcul des structures électroniques ($\sigma + \pi$) des borazines et des boroxines substitués de symétrie D_{3h}: une estimation théorique de l'aromaticité comparée de ces molécules 423

A Simple Method to Calculate the σ- and π-Electron Structure of Borazines and of Substituted Boroxines of Symmetry D_{3h}: A Theoretical Estimation of the Relative Aromaticity of those Molecules

MURRELL, J. N., and G. SHAW: H—H Interactions in the Region of Small Orbital Overlap 434

SALEZ, C., and A. VEILLARD: A Comparison of Different Contractions for Molecular Calculations with Gaussian-Type Functions 441

Relationes

TINLAND, B.: A CNDO Study of Steric Effects in Biphenyl 452

THORHALLSSON, J., C. FISK, and S. FRAGA: Physical Properties of Many-Electron Atomic Systems Evaluated from Analytical Hartree-Fock Functions. VIII. The Use of Approximate Functions for Lowest and Excited States 455

STAMPER, J. G.: A Note on the Treatment of Quadruple Excitations in Configuration Interaction 459

Erratum

RUCH, E.: Homochiralität als Klassifizierungsprinzip von Molekülen spezieller Molekülklassen 462

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Druck: Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

Printed in Germany

Verantwortlich für den Anzeigenteil: Edgar Seidler, 1 Berlin 33, Heidelberger Platz 3